

修 士 論 文 の 和 文 要 旨

研究科・専攻	電気通信大学大学院 電気通信学研究科 電子工学専攻 博士前期課程		
氏 名	佐藤耕平	学籍番号	0832029
論 文 題 目	有限電界下での第一原理的光学応答計算プログラムの開発と SiGe 混晶への応用		
要 旨			
<p>今日の高度情報社会を支える重要な基盤技術である電子・光技術にとって、Si などの半導体デバイスは非常に重要な役割を果たしている。そのデバイスの微細化による動作速度向上には限界がきているため結晶歪みによる向上が期待されている。Si 歪みを与えるには Si よりも格子定数がやや大きい SiGe が重要な役割を荷っており、その SiGe の物性評価は注目されている。一方で、近年、それらの物質設計の現場では理論計算が重要な役割を担うようになってきた。特に、物質の基底状態の性質（構造、バンド分散など）には、いわゆる第一原理計算が極めて有効である事が認識されつつある。しかし、外場下での物質の機能、応答については未解決な理論的問題が多く残されている。我が研究室では有限電界をハミルトニアンに組み込んだ基底状態計算を用いて、線形応答の範囲内で誘電率の空間分布などを評価する手法を開発してきた。</p> <p>本研究においては有限電界下での第一原理光学応答計算プログラムの開発をするとともに、その計算プログラムを用いて SiGe 混晶に適用した。それにより、SiGe 混晶の分極を評価し、誘電率を求めた。</p> <p>SiGe 結晶において誘電率は Si と Ge の中間の値ではなくやや Si よりの値を示す事が明らかとなった。また、optical な誘電率と static な誘電率を比較した際、SiGe バルク結晶は同じⅣ-Ⅳ族結晶である 3C-SiC の結晶とは異なり、格子分極の寄与がほとんど影響せず、ほとんどが電子の寄与に依って誘電率が評価された。一方で $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ バルクの結晶比を変化させた際に格子定数は線形的にベガード則に則るのに対し、誘電率はそれとは異なり非線形的に変化する事が明らかとなった。</p>			